

## **EXAMEN DE FISICOQUÍMICA II. 22 de mayo de 2001**

---

### **PRIMERA PARTE: QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL**

Esta primer parte incluye 6 preguntas que corresponden al 60% del total del examen. Dispondrá de un tiempo máximo de 2 hs. para contestarlas. Cada pregunta tiene un valor máximo asignado de 1 punto. **La suficiencia en esta parte del examen se logra obteniendo un mínimo de 3 de los 6 puntos disponibles** para la misma.

- 1) a) Explique como se construye la función de onda polielectrónica de un átomo a partir de los orbitales atómicos correspondientes. b) ¿De que manera puede utilizar esta construcción de la función polielectrónica para demostrar el principio de exclusión de Pauli? c) ¿En qué se diferencia una función de onda RHF de una UHF?
- 2) a) En el contexto de la Teoría de Orbitales Moleculares indique qué características deben tener los orbitales atómicos a combinar para lograr formar un orbital molecular b) Indique qué es un conjunto de base y que tipo de funciones es posible utilizar para los mismos, discutiendo ventajas y desventajas de cada una de ellas.
- 3) Realice una descripción de los distintos tipos de métodos introducidos en el curso para llevar a cabo el análisis de la estructura y propiedades moleculares. Incluya en su respuesta consideraciones relativas al tiempo, precisión y tipo de propiedad que cada método puede predecir en forma correcta.
- 4) a) Explique qué es el momento dipolar de transición y que rol cumple el mismo en Espectroscopía Molecular b) ¿Qué relación existe entre el momento dipolar de transición y las reglas de selección?
- 5) Para cada una de los siguientes tipos de espectroscopía explique que tipo de transición da lugar a la misma, que condición debe cumplir una molécula para ser activa y que información puede obtener con ella:  
a) Microondas; b) Raman rotacional; c) Infrarrojo; d) UV-vis; e) Resonancia Magnética Nuclear.
- 6) a) Explique qué es una función de partición molecular y qué información puede obtener a partir de la misma. b) ¿Qué relación existe entre la función de partición molecular y la función de partición canónica?

**NOTA: EN EL CASO QUE INCLUYA ECUACIONES EN SUS RESPUESTAS, NO OLVIDE IDENTIFICAR CLARAMENTE CADA UNA DE LAS MAGNITUDES INVOLUCRADAS. DE NO HACERLO, ESTO AFECTA EL PUNTAJE QUE OBTIENE POR SU RESPUESTA!!**

## NUEVO FUNCIONAMIENTO DEL EXAMEN DE FISICOQUIMICA II

A partir del año 2001 cada parte del examen correspondiente a los dos módulos que integran el curso se rendirá en días separados (habitualmente se programará para un viernes el examen sobre el módulo de Química Teórica, y el examen sobre el módulo de Electroquímica será tomado el martes sucesivo).

*El número de preguntas global y su grado de dificultad será el mismo que el utilizado hasta el momento. El tiempo global disponible se ve aumentado en media hora (se asigna un tiempo máximo de 2 hs para las preguntas de QTC y de 1.5 hs para las preguntas y ejercicios de EQ).*

**El día lunes siguiente al examen** del módulo de Química Teórica se publicará en la cartelera del LQTC un listado provisional de resultados en el que se indicarán tres posibilidades:

- a) **APROBADO QTC:** el estudiante ha logrado francamente la suficiencia en este módulo (3 o más puntos sobre los 6 disponibles), de lograrla la suficiencia también en el módulo EQ, aprueba el examen.
- b) **Dudoso QTC:** el estudiante no ha logrado la suficiencia en este módulo, pero se encuentra en la franja de 2.7-2.9/6 puntos. Puede llegara a aprobar el examen en caso de obtener una muy buena calificación en el módulo de EQ.
- c) **APLAZADO QTC:** el estudiante ha obtenido un puntaje notoriamente inferior al suficiente en este módulo, quedando ya determinado el resultado final de APLAZADO, deberá volver a rendir el examen en una fecha posterior.

En base a estos resultados el estudiante podrá decidir la conveniencia o no de presentarse a la segunda parte del examen.

**A partir de las 12 hs del lunes siguiente** a la toma de la primera parte del examen, aquéllos estudiantes que la hayan rendido, podrán consultar telefónicamente en el LQTC su resultado. En un futuro esperamos poder brindar esta información también a través de la página Web del LQTC.

**Las calificaciones finales del examen estarán publicadas dentro de los 10 días hábiles siguientes a la primer parte del examen, como indica el reglamento general de cursos y exámenes de la Facultad de Ciencias.**

**RECOMENDACION ESPECIAL:** Si bien el número de estudiantes que aplaza no es despreciable (un 15-20% aproximadamente en cada fecha), muy pocos acuden al Laboratorio para ver la corrección de su examen o utilizan las clases de consulta para eliminar dudas y aclarar conceptos antes de presentarse al examen. A aquéllos estudiantes que no logren superar la evaluación en esta instancia los exhortamos especialmente a aprovechar estas posibilidades de atención por parte del cuerpo docente como apoyo para lograr un resultado exitoso en su próximo intento.